Quantenmechanik II, WS 12/13

Schwerpunkte

A: Relativistische Quantenmechanik

→ relativ. invariante Wellengleichungen

- Klein-Gordon-Glg.
- Dirac-Glg.: Spin
  Feinstruktur der (H-) Spektren

B: Vielteilchen Quantenmechanik

- Systeme identischer Teilchen, 2. Quantisierung
  Besetzungszahldarstellung, Erzeugungs- Vernichtungsoperatoren
- Näherungsmethoden f. Vielteilchensysteme

C Aspekte der Quantenfeldtheorie

I. Relativistische Quantenmechanik

1. Wellg.: Schrödinger'sche Wellenmechanik

Bewegung eines Teilchens (→ T.) in $U(\underline{r})$

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\underline{r}) \xrightarrow[p \to \hat{p} = -i\hbar\underline{\nabla}]{E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\underline{r})$$

↑ Energie eines (nichtrelat.) T. der Masse m ohne Spin

Observable ⟺ hermitescher Operator

$\hat{r} = \underline{r}, \quad \hat{p} = -i\hbar\underline{\nabla}$

Korrespondenzprinzip

„1. Quantisierung"

Ortsdarstellung der QM im Hilbert-Raum

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(\underline{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r})\right]\psi(\underline{r},t)}$$

Schrödinger-Glg. (SG) für nichtrelat. Bewegung in $U(\underline{r})$ (1)

ZUSTAND ⟺ $\psi(\underline{r},t)$, i.a. komplexe Wellenfunktion (→ WF.)

Born'sche (statistische) Interpretation d. WF.

$\underbrace{|\psi(\underline{r},t)|^2}\, d^3r = \underbrace{\psi(\underline{r},t)\psi^*(\underline{r},t)}\, d^3r$ — Wahrscheinlichkeit, das qm. T. zum Zeitpunkt t in $(\underline{r}, \underline{r}+d\underline{r})$ zu finden

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (→ AWD.)

◎ Nach einfachen Umformungen folgt aus der SG. eine Kontinuitätsglg. f. AWD., denn

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \cdot \psi \quad | \cdot \psi^*$$

$$-) \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U \cdot \psi^* \quad | \cdot \psi$$

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \underbrace{\frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right)}_{\frac{i\hbar}{2m}} \nabla \cdot \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j} = 0 \qquad (2)$$

mit $\rho(\underline{r}, t) := \psi^*(\underline{r}, t) \psi(\underline{r}, t) \rightarrow$ AWD., positiv definit (3a)

und $\underline{j}(\underline{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \rightarrow$ (3b)

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

FAZIT: SG ist als Kontinuitätsglg. für die (positive) AWD. interpretierbar.

Übergang zur klassischen Mechanik (→ kM.)

vgl. L^2, Bd III, § 18

Wir haben SG postuliert, nicht hergeleitet.

Beschreibt sie "wenigstens" im Grenzfall $\hbar \to 0$ die kM?

Ansatz: $\psi(\underline{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\underline{r},t)}$

ψ: komplexwertige WF; S: reellwertige S-Funktion

mit $S(\underline{r},t) = S_0(\underline{r},t) + i\hbar S_1(\underline{r},t) + (i\hbar)^2 S_2(\underline{r},t) + \ldots$

Näherung: $\psi \simeq e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + i\hbar S_1)} = e^{\frac{i}{\hbar}S_0 - S_1} =$

$$= a(\underline{r},t) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\underline{r},t)}$$

in dieser Näherung ist die AWD.

$|\psi(\underline{r},t)|^2 \equiv a^2(\underline{r},t)$

NR: • $\underline{\nabla}\psi \simeq e^{\frac{i}{\hbar}S_0}\left(\underline{\nabla} a + \frac{i}{\hbar} a \underline{\nabla} S_0\right)$

• $\underline{\nabla}^2\psi \simeq e^{\frac{i}{\hbar}S_0}\left[\underline{\nabla}^2 a + \frac{i}{\hbar}\underline{\nabla} a \underline{\nabla} S_0 + \frac{i}{\hbar} a \underline{\nabla}^2 S_0 + \frac{i}{\hbar}\underline{\nabla} S_0 \left(\underline{\nabla} a + \frac{i}{\hbar} a \underline{\nabla} S_0\right)\right] =$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}S_0}\left[\underline{\nabla}^2 a + 2\frac{i}{\hbar}\underline{\nabla} a \underline{\nabla} S_0 + \frac{i}{\hbar} a \underline{\nabla}^2 S_0 - \frac{1}{\hbar^2} a (\underline{\nabla} S_0)^2\right]$$

• $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \simeq e^{\frac{i}{\hbar}S_0}\left(i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} - a\frac{\partial S_0}{\partial t}\right)$

---

eingesetzt in SG $i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\cdot\psi$ (linear)

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a\frac{\partial S_0}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla^2 a + 2\frac{i}{\hbar}\nabla a\,\nabla S_0 + \frac{i}{\hbar}a\nabla^2 S_0 - \frac{1}{\hbar^2}a(\nabla S_0)^2\right] + U\cdot a$$

Terme d. Ordnung $\hbar^0$: $-a\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m}a(\nabla S_0)^2 + U\cdot a$ $\quad | a \neq 0$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + U = 0}$$

S_0 genügt der Hamilton-Jakobi-Glg. der klass. Punktmech. (nichtlinear)

erinnere: $-\frac{\partial S}{\partial t} = H(\underline{r},\nabla S,t) \underset{\text{hier}}{=} \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U(\underline{r})$

Terme der Ordnung $\hbar^1$: $i\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{i}{m}\nabla a\,\nabla S_0 - \frac{i}{2m}a\nabla^2 S_0$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{2m}a\nabla^2 S_0 + \frac{1}{m}\nabla a\cdot\nabla S_0 = 0 \quad | \cdot 2a$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial a^2}{\partial t} + \nabla\Big(a^2 \underbrace{\frac{\nabla S_0}{m}}_{\text{Geschwindigkeit d. klassischen T. } \frac{p}{m}}\Big) = 0}$$

Kontinuitätsglg. für Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD)

Interpretation: Die durch die WF $\psi(r,t)$ beschriebene Bewegung geht für $\hbar\to 0$ i.a. nicht in eine Bewegung entlang einer bestimmten Bahnkurve über. Stattdessen verschiebt sich die AWD $|\psi(r,t)|^2$ im Laufe der Zeit in Übereinstimmung mit den Gesetzen d. KM.

FAZIT: ~~Mit SG folgt korrespondenz zur KM gepaßte Glg. ist für $\hbar\to 0$ zumindest korrekt.~~

2. Die Klein-Gordon-Glg. (→ KGG)

SG wahrt die Korrespondenz zur klass. Punktmechanik im Grenzfall $\hbar \to 0$. Vor allem sind die aus dieser Glg. folgenden Voraussagen für das Verhalten qm T. bei niedrigen kinetischen Energien experimentell bestätigt ... (QM I)

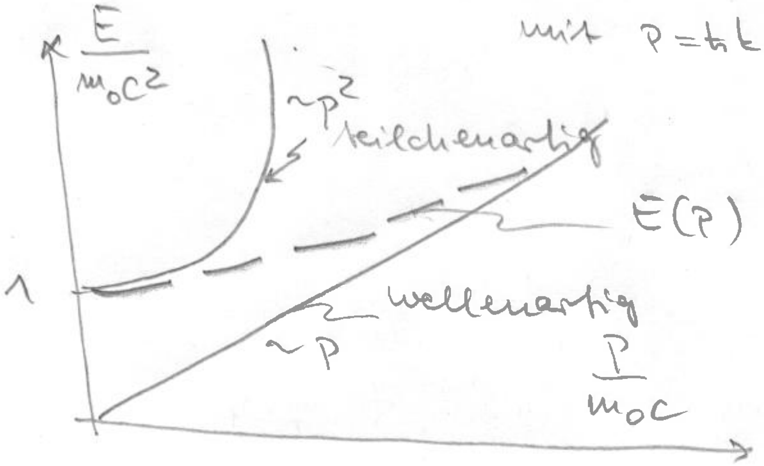
ABER: SG ist nicht Lorentz-invariant ... → Suche nach einer relativistisch invarianten Verallgemeinerung d. SG

① „Aufstellung" der KGG unter Verwendung des Korrespondenzprinzips:

Ausgangspunkt: relativistische Energie-Impuls-Relation

$$E(p) = \sqrt{p^2c^2 + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ruhemasse}}}{m_0^2}c^4} = \begin{cases} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ruheenergie}}}{m_0c^2} + \underbrace{\dfrac{p^2}{2m_0}}_{\substack{\text{Energie freier T. in KM} \\ \text{(nichtrelativ.)}}}, & p \ll m_0c \\ p \cdot c, & p \gg m_0c \end{cases}$$

mit $p = \hbar k$, $E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = ck$ – Dispersion em. Wellen im Vakuum



Offensichtlich „interpoliert" $E(p)$ zwischen Teilchen und Wellen

Korrespondenzprinzip

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4 \xrightarrow[\underline{p} \to -i\hbar\underline{\nabla}]{E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\psi = (-i\hbar\underline{\nabla})^2 c^2\psi + m_0^2c^4\psi$$

$$\left(\underline{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi(\underline{r},t) = 0$$ Klein-Gordon-Glg. für freie T.

$$\left(\Box + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi(\underline{r},t) = 0$$

d'Alembert-Operator (L-invariant)

Die KGG ist offensichtlich[1] L-invariant: So reduziert sie sich für $m_0 = 0$ auf die (klassische homogene) Wellenglg. die aus den L-invarianten Maxwellglgn abgeleitet wird.

Bem.: 1) Verallgemeinerungen d. KGG enthalten äußere Potenziale oder elektromagn. Felder

2) $\frac{\hbar}{m_0 c}$ ist die Compton-Wellenlänge eines T. der Masse m_0

---

1) oder in Vierer-Schreibweise $\left[\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right]\psi = 0$

ψ: Skalarfeld, Tensorfeld 0ter Ordnung

Physik. Interpretation d. Klein-Gordon-Glg

Lösungen d. KGG für freie Teilchen

$$\psi(\underline{r},t) = \psi_0\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)} = \psi_0\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r}-Et)}$$

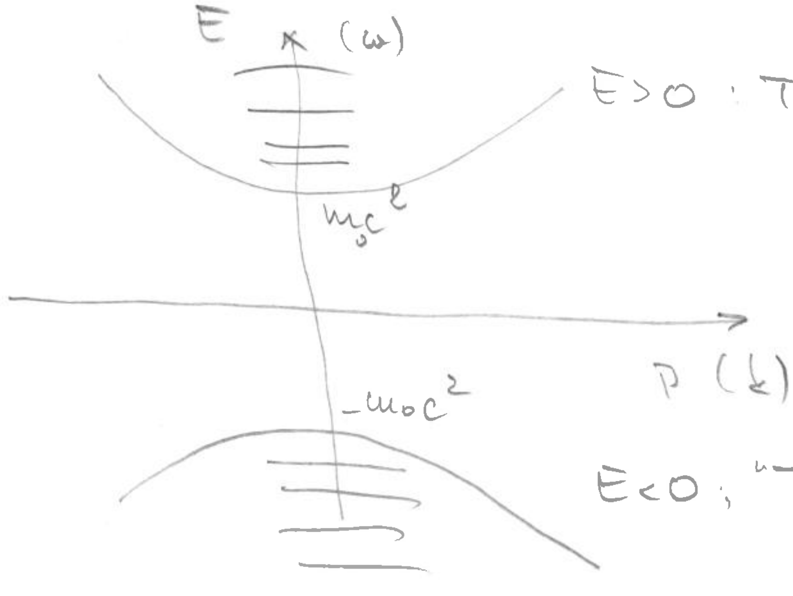
→ ebene Wellen

$$0 = \underline{\nabla}^2\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi = \underbrace{\left(-\frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{1}{c^2}\left(-\frac{E^2}{\hbar^2}\right) + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)}_{0:\ E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4}\psi$$

$$\Rightarrow\quad E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$$

KGG für freie T. besitzt zwei Lösungen in Form ebener Wellen, eine mit positiver, die andere mit <u>negativer</u> Energie; letztere werden wir als <u>Antiteilchen</u> interpretieren (s.u.)

Die Energie ist also nicht nach unten beschränkt:



E>0 : T. mit Ruheenergie m_0c^2

E<0 ; "T." mit Ruheenergie $-m_0c^2$

Kontinuitätsglg.

Auch die KGG lässt sich als Kontinuitätsglg. schreiben. Analog zur Vorgehensweise auf S. -2- folgt

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j} = 0$$

mit $$\underline{j} = -\frac{\hbar i}{2m_0}\left(\psi^* \underline{\nabla}\psi - \psi \underline{\nabla}\psi^*\right)$$

Stimmt im nichtrelat. Grenzfall mit Wahrsch.-strom-dichte d. SG überein

und $$\rho := \frac{i\hbar}{2m_0c^2}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)$$

Es läge nahe, ρ als WD zu interpretieren. Da aber die KGG eine Differentialglg. 2. Ordnung in t ist, können (unabh. voneinander) Anfangswerte für ψ und $\partial\psi/\partial t$ vorgegeben werden. Folglich kann ρ als Fkt von $\underline{r}$ sowohl positiv als auch negativ sein. Damit ist eine Interpretation von ρ als positiv definite AWD. verwehrt. - aus diesem Grunde wurde lange Zeit am physikalischen Sinn der KGG gezweifelt.

Ausweg: Ladungsinterpretation d. KGG

Definiere durch Multiplikation mit Elementarladung e

Ladungsdichte $\rho'(\underline{r},t)$: $$\rho' := \frac{i\hbar e}{2m_0c^2}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)$$

Ladungsstromdichte $\underline{j}'(\underline{r},t)$

$$\underline{j}' := -\frac{ie\hbar}{2m_0}\left(\psi^* \underline{\nabla}\psi - \psi \underline{\nabla}\psi^*\right)$$

Ladungsdichte darf positiv, negativ oder Null sein ...

Beispiel: $\varrho'(\underline{r},t)$ und $\underline{j}'(\underline{r},t)$ für freie T.

Wir finden mit

$$\psi_{(\pm)}(\underline{r},t) = A_{(\pm)}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r} \mp |E| t)} \quad , \quad E = \pm\sqrt{\underline{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

nach einfacher Rechnung

$$\varrho'_{(\pm)}(\underline{r},t) = \pm \frac{e|E|}{m_0 c^2}\, \psi^*_{(\pm)}(\underline{r},t)\, \psi_{(\pm)}(\underline{r},t)$$

Interpretation:

1) $\psi_{(+)}$ beschreibt T. mit Ladung $+e$

$\psi_{(-)}$ -- T. derselben Masse, aber Ladung $-e$.

Allgem. Lösung der KGG Linearkombination von $\psi_{(+)}$ und $\psi_{(-)}$.

2) Einstrahlung von Energie $> 2m_0c^2$ kann zu Teilchen-Antiteilchen Erzeugung führen: Wie exp. beobachtet, treten Teilchen erzeugende und T. vernichtende Prozesse auf $\Rightarrow$ keine Teilchenzahlerhaltung bei relativistischen Energien.

Relativ. QM als Einteilchentheorie nicht mehr konsistent...

Nichtrelativistischer Grenzfall der Klein-Gordon-Glg.

Ansatz: $\psi(\underline{r},t) = \varphi(\underline{r},t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}$

Ruheenergie im Zeitfaktor abspalten

NR: $\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\dfrac{\partial\varphi}{\partial t} - \dfrac{i}{\hbar} m_0 c^2 \varphi\right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \simeq -i \dfrac{m_0 c^2}{\hbar} \varphi\, e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}$

denn $\left| i\hbar \dfrac{\partial\varphi}{\partial t} \right| \sim E'\varphi \ll m_0 c^2 \varphi$ wenn

$E' := E - m_0 c^2 \ll m_0 c^2$

also kinet. Energie $\ll$ Ruheenergie

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} m_0 c^2 \varphi\right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \simeq$$

$$\sim -\left(\frac{i}{\hbar} 2 m_0 c^2 \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2}\varphi\right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}$$

Einsetzen in $\left(\underline{\nabla}^2 - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2} + \dfrac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right) \varphi\, e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} = 0$

gibt

$$-\frac{1}{c^2}\left(\frac{i}{\hbar} 2 m_0 c^2 \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \cancel{\frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2}}\varphi\right) = \left(\underline{\nabla}^2 - \cancel{\frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}}\right)\varphi$$

also $\quad i\hbar \dfrac{\partial\varphi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m_0} \underline{\nabla}^2 \varphi \quad$ SG für freies T. <u>ohne Spin</u>

Schlussfolgerung

1) im nichtrelativ. Grenzfall $E' \ll m_0 c^2$ geht die KGG in die SG über

2) KGG ist eine relativ. invariante Wellenglg. für <u>Teilchen mit Spin 0</u>

• Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld

em.

Erinnere: em. Potenziale

(i) $\underline{B} = \mathrm{rot}\, \underline{A}$, $\underline{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \underline{A}}{\partial t}$

$\underline{B}$ und $\underline{E}$ invariant unter der Eichtransformation

$\underline{A} \to \underline{A}' = \underline{A} + \nabla \chi$, $\phi \to \phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}$ (χ - beliebige, dfb., skalare Funktion von $\underline{r}, t$)

(ii) Klassische Mechanik

$$H = \frac{\underline{p}^2}{2m} \longrightarrow H = \frac{(\underline{p} - \frac{q}{c}\underline{A})^2}{2m} + q \cdot \phi$$

ungeladenes T. der Masse m

geladenes T. (Masse m, Ladung q)

↳ dann die Hamilton'schen Bewegungsglgn. führen auf Newton'sche Glg. mit Lorentz-Kraft

$$m\ddot{\underline{r}} = q(\underline{E} + \dot{\underline{r}} \times \underline{B})$$

(enthält nur die eichinvarianten Messgrößen $\underline{E}$ und $\underline{B}$)

(iii) Schrödinger-Glg. für geladenes nichtrelativist. freies Teilchen

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A})^2}{2m} + q \cdot \phi \right] \psi$$